

## DEL ESTUDIO DE LA MOLÉCULA AL DISPOSITIVO

I. Arrechea-Marcos<sup>1</sup>, R. Ponce Ortiz<sup>1</sup>, J.T. López Navarrete<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Departamento de Química-Física, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos s/n, Málaga 29701, i.arrechea@uma.es

**Palabras Clave:** *materiales orgánicos  $\pi$ -conjugados, OFET, estudio espectroscópico, cálculos DFT.*

Los materiales orgánicos  $\pi$ -conjugados han destacado en las últimas décadas como alternativas prometedores al silicio en su uso en dispositivos electrónicos, como por ejemplo transistores orgánicos de efecto campo (OFETs) o células solares orgánicas (OPVs).[1] En estos materiales, el comportamiento del dispositivo está principalmente determinado por su esqueleto conjugado. [2] Por ello, sistemas orgánicos con alto grado de planaridad, eficiente deslocalización  $\pi$ -electrónica y adecuadas interacciones intermoleculares resultan de gran interés para semiconductores moleculares y poliméricos.

En nuestro grupo de investigación, haciendo uso de diferentes técnicas espectroscópicas, electroquímicas, espectroelectroquímicas y de cálculos teóricos químico-cuánticos DFT, tratamos de llegar a una mejor comprensión del comportamiento fisicoquímico de estos compuestos, con el fin de buscar relaciones existentes entre estructura y propiedad. Estos estudios resultan primordiales para guiar los esfuerzos sintéticos encaminados a la obtención de compuestos orgánicos  $\pi$ -conjugados con propiedades mejoradas, obteniendo así dispositivos electrónicos con mayores rendimientos.[3]

### Referencias

- [1] (a) Chengliang Wang, Huanli Dong, Wenping Hu, Yunqi Liu, and Daoben Zhu. *Chem. Rev.*, **2012**, *112*, 2208–2267 (b) Tim Erdmann, Simone Fabiano, Begoña Milián-Medina, David Hanifi, Zhihua Chen, Magnus Berggren, Johannes Gierschner, Alberto Salleo, Anton Kiri, Brigitte Voit, Antonio Facchetti. *Adv. Mater.*, **2016**, *28*, 9169-9174
- [2] (a) Takimiya, K.; Shinamura, S.; Osaka, I.; Miyazaki, E. *Adv. Mater.* **2011**, *23*, pp4347-4370. (b) Tianyue Zheng, Zhengxu Cai, Rosina Ho-Wu, Sung Hei Yau, Valerii Shaparov, Theodore Goodson, and Luping Yu. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 868– 875. (c) Alexander H. Endres, Manuel Schaffroth, Fabian Paulus, Hilmar Reiss, Hubert Wadepohl, Frank Rominger, Roland Krämer, and Uwe H. F. Bun. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 1792-1795.
- [3] (a) Alejandro de la Peña, Iratxe Arrechea-Marcos, María J. Mancheño, M. Carmen Ruiz Delgado, J. Teodomiro López Navarrete, José L. Segura, and Rocío Ponce Ortiz. *Chem. Eur. J.*, **2016**, *22*, 13643-13652. (b) I. Arrechea-Marcos, P. de Echegaray, M. J. Mancheño, M. C. Ruiz Delgado, M. M. Ramos, J. A. Quintana, J. M. Villalvilla, M. A. Díaz-García, J. T. López Navarrete, R. Ponce Ortiz and J. L. Segura. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2017**, *19*, 6206-6215.